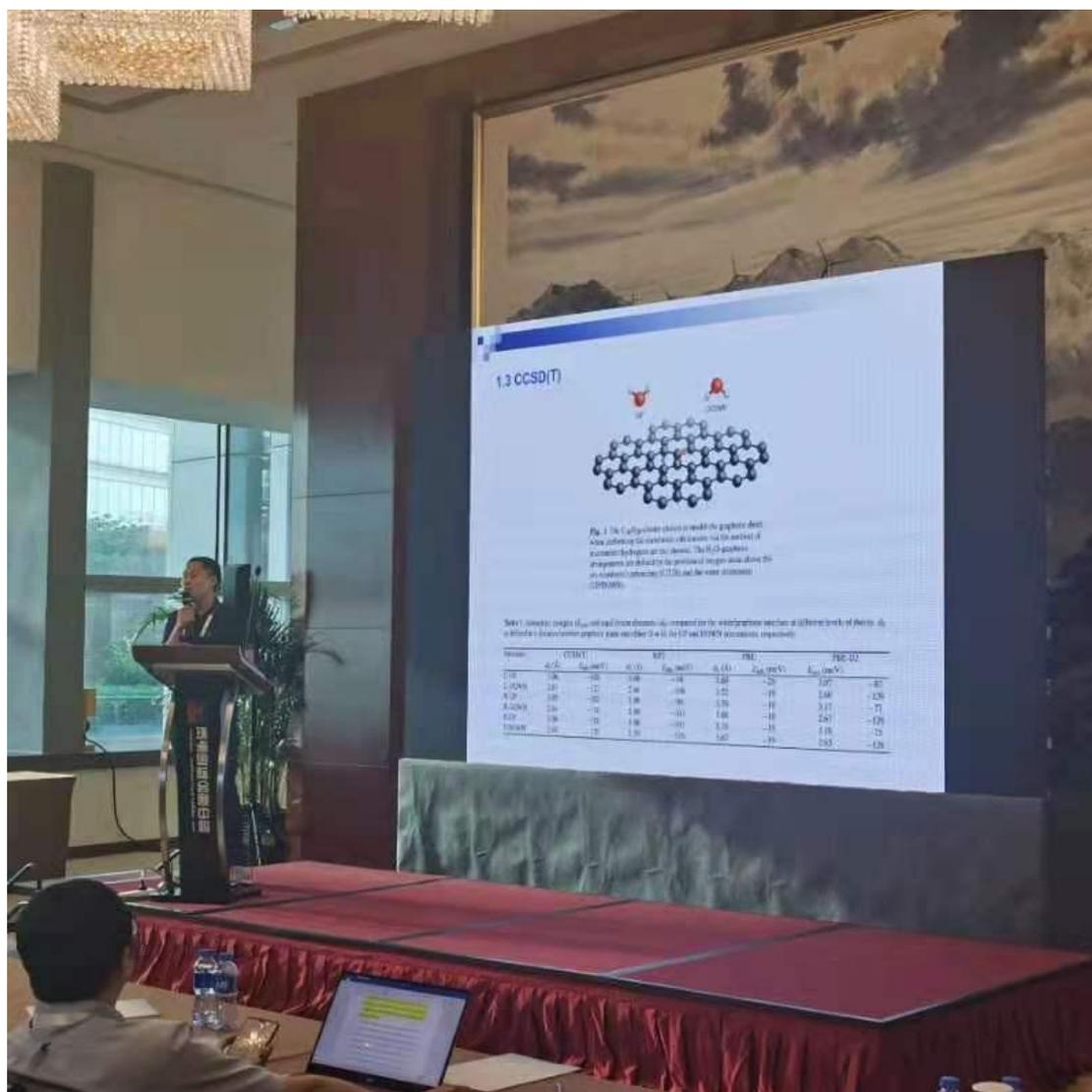


低维光电材料与器件湖北省重点实验室成员类淑来博士 参加中国化学会第三十二届学术年会并作报告

(教工通讯员 陈美华) 4月18日-22日, 中国化学会第32届学术年会在珠海国际会展中心召开。低维光电材料与器件湖北省重点实验室成员类淑来副教授参加本届学术年会, 作了题为《Curvature-dependent adsorption of water inside and outside armchair carbon nanotubes》的学术报告。



(类淑来博士作学术报告现场 图片由会场人员提供)

报告主要介绍了类淑来所负责的能量存储与转化材料理论设计及性能预测校级科技创新团队在 **the method of increments** 方面的工作，通过对受限体系中物质相变的计算，比较了传统密度泛函理论方法和 HF 方法的优缺点，提出了应用新型局域轨道化方法对受限体系进行高精度量子化学计算可能性，并根据高精度量子化学方法的计算结果拟合出了一套新的适用于受限体系的分子力场参数。报告最后向与会人员推介了低维光电材料与器件湖北省重点实验室的科研平台建设与学术进展概况。报告内容引起了与会同行的浓厚兴趣，并进行了热烈讨论。

审稿人：汪竞阳